

مقایسه‌ی عملکرد حذف آلاینده‌ی آروماتیک هوا با کاتالیست‌های $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ و $\text{g-C}_3\text{N}_4$ با استفاده از روش سطح پاسخ مبتنی بر طرح مرکب مرکزی

فرشید قربانی شهنا^۱، رضوان عابدینلو^{۲*}، عبدالرحمن بهرامی^۱، سعید عزیزیان^۲، مجید حبیبی محرز^۱

۱. گروه مهندسی بهداشت حرفه‌ای و ایمنی کار، دانشکده بهداشت، دانشگاه علوم پزشکی همدان، همدان، ایران.

۲. گروه شیمی-فیزیک، دانشکده علوم نفت و شیمی، دانشگاه بوعلی، همدان، ایران.

تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۰۸/۱۰

تاریخ انتشار: ۱۴۰۴/۰۹/۲۹

چکیده

مقدمه: ترکیبات آلی فرار به‌عنوان مهم‌ترین و متنوع‌ترین آلاینده‌های گازی هوا، می‌توانند منجر به مشکلات متعدد بهداشتی و زیست‌محیطی گردند، بنابراین کنترل انتشار آن‌ها از هوای محیط‌های کاری، امری مهم و ضروری است. فناوری اکسیداسیون فتوکاتالیستی به دلیل قابلیت تبدیل آلاینده‌ها به ترکیبات کم‌خطرتر در حضور نور، در سال‌های اخیر مورد استقبال فراوانی قرار گرفته است. هدف از این مطالعه، مقایسه عملکرد تخریب تولوئن هوا توسط فتوکاتالیست $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ و $\text{g-C}_3\text{N}_4$ تحت نور مرئی بوده است.

روش: فتوکاتالیست $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ و $\text{g-C}_3\text{N}_4$ سنتز و راندمان حذف فتوکاتالیستی تولوئن توسط آن‌ها در نور مرئی مورد بررسی قرار گرفت. کاتالیزورها با استفاده از تکنیک‌های FTIR، XRD، FE-SEM، EDX آنالیز شدند. اثرات غلظت تولوئن ورودی، سرعت جریان هوا، رطوبت نسبی و بر همکنش‌های آن‌ها بر راندمان حذف تولوئن با استفاده از روش طراحی مرکب مرکزی بررسی شد.

یافته‌ها: میزان راندمان حذف تولوئن برای $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ حدود ۲۵/۵ درصد و برای $\text{g-C}_3\text{N}_4$ ۱۹ درصد بدست آمد که راندمان بهتر $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ را می‌توان به باند گپ باریک‌تر و ساختار لوله‌ای آن نسبت داد. غلظت اولیه تولوئن بیشترین و رطوبت نسبی کمترین تأثیر را بر راندمان حذف فتوکاتالیستی داشت.

نتیجه‌گیری: کاتالیست $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ راندمان نسبتاً بهتری نسبت به $\text{g-C}_3\text{N}_4$ داشت. با توجه به اینکه هر دو کاتالیست دارای مزایای قابل توجهی همچون عدم سمیت، سنتز آسان، دسترسی و قیمت پایین هستند، احتمالاً بتوان از آن‌ها در محیط‌های واقعی برای غلظت‌های کم آلاینده‌های فرار استفاده کرد.

کلیدواژه: آلاینده‌های هوا، فتوکاتالیست، رآکتور، نور مرئی، روش سطح – پاسخ

*نویسنده مسئول: رضوان عابدینلو، ایمیل: R.abedinloo@gmail.com

ارجاع: قربانی شهنا فرشید، عابدینلو رضوان، بهرامی عبدالرحمن، عزیزیان سعید، حبیبی محرز مجید. مقایسه عملکرد حذف آلاینده‌ی آروماتیک هوا با کاتالیست‌های $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ و $\text{g-C}_3\text{N}_4$ با استفاده از روش سطح پاسخ مبتنی بر طرح مرکب مرکزی. مجله دانشکده علوم پزشکی ساوه، ۱۴۰۴؛ (۳): ۸۲-

doi: 10.22034/sumsj.2026.569671.1071 .۹۲

مقدمه

آلودگی هوا به‌عنوان یکی از جدی‌ترین مسائل دنیای کنونی، تأثیرات منفی بر سلامت انسان، تولید و اکوسیستم دارد (۱). ترکیبات آلی فرار (VOCs) به‌عنوان مهم‌ترین و متنوع‌ترین آلاینده‌های گازی هوا، می‌توانند منجر به آسیب به سیستم تنفسی-ریوی، سیستم عصبی شده و همچنین باعث ایجاد آلرژی، سرطان و سایر بیماری‌های مزمن گردند (۲). بنابراین کنترل انتشار آن‌ها از هوای محیط‌های کاری امری مهم و ضروری است. در کنار روش‌های مرسوم کنترل آلاینده‌های گازی، امروزه روش‌های نوین همانند تکنیک‌های اکسیداسیون کاتالیستی، اکسیداسیون فتوکاتالیستی، تصفیه زیستی و جاذب‌های مبتنی بر نانومواد توجه زیادی به خود جلب کرده‌اند (۳). از میان این تکنیک‌ها، فناوری اکسیداسیون فتوکاتالیستی (PCO²) به‌دلیل زمان کوتاه‌تر فرآیند، سادگی و قابلیت تبدیل آلاینده‌ها به ترکیبات کم‌خطرتر در دما و فشار استاندارد، در سال‌های اخیر مورد توجه و استقبال فراوانی قرار گرفته است. در فرآیند اکسیداسیون فتوکاتالیستی، با تاباندن پرتویی (نور فرابنفش یا نور مرئی) با انرژی برابر یا بالاتر از انرژی شکاف باند^۳ (Bg) آلاینده، الکترون‌ها از باند ظرفیت^۴ (VB) به باند رسانش^۵ (CB) نیمه رسانا برانگیخته می‌شوند. در اثر برانگیختگی نوری الکترون‌ها، حفرات مثبت در باند ظرفیت ایجاد شده و الکترون تولید رادیکال هیدروکسیل (OH) یا رادیکال هیدروکسیل اکسید کننده (OH) می‌کنند (۴). به دلیل محدودیت‌های استفاده از نور فرابنفش، در سال‌های اخیر پژوهش بر روی کاتالیست‌هایی که با نور مرئی فعال می‌شوند؛ به‌طور چشمگیری افزایش یافته است (۵). $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ یکی از کاتالیست‌های فعال با نور مرئی بوده، تا طول موج ۶۰۰ نانومتر نور را جذب می‌کند و تا ۴۰٪ از انرژی طیف خورشیدی را دریافت می‌کند، و یکی از ارزان‌ترین نیمه‌هادی‌های موجود است (۶). کربن نیتريد گرافیتی ($\text{g-C}_3\text{N}_4$) نیز به‌عنوان نیمه‌رسانای فعال با نور مرئی در حدود ۴۶۰ nm، به دلیل ویژگی‌های منحصر به فرد خود، به یک

کلاس جدید از نانوفناوری‌های چندمنظوره برای کاربردهای الکترونیکی، کاتالیستی و انرژی تبدیل شده است (۲). سطح مطلوب CB بالای $\text{g-C}_3\text{N}_4$ بسیار منفی‌تر از هم‌تایان نیمه‌رسانا غیرآلی متعارف آن و پتانسیل‌های واکنش‌های تولید H_2 ، کاهش CO_2 و کاهش O_2 است که نشان می‌دهد الکترون‌های تولید شده در $\text{g-C}_3\text{N}_4$ دارای نیروی ترمودینامیکی زیادی برای کاهش انواع مولکول‌های کوچک مانند H_2O ، CO_2 و O_2 هستند (۷، ۸). اگرچه در مطالعات متعددی به کارایی حذف آلاینده‌ها توسط دو کاتالیست مذکور در محیط‌های مائی پرداخته شده است اما مطالعات در حوزه‌ی هوا به خصوص در رابطه با $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ با ساختار لوله‌ای محدود است. بنابراین هدف از این مطالعه، مقایسه عملکرد تخریب تولوئن هوا توسط فتوکاتالیست $\text{g-C}_3\text{N}_4$ و $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ تحت نور مرئی بوده است.

روش

سنتز نانوکاتالیست‌ها

$\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ با استفاده از ۲/۷۸ گرم سولفات آهن ۷آبه و ۳/۲۸ گرم سدیم استات برای بدست آوردن محلول زرد رنگ به روش هم‌رسوبی و هم زدن بر روی همزن مغناطیسی با دمای ۴۰ درجه سلسیوس به مدت حدود ۱ ساعت تهیه شد. سپس محلول فیلتر و مواد باقی مانده در دمای ۶۰ درجه سانتی‌گراد خشک گردید و نهایتاً در دمای ۳۰۰ درجه سلسیوس و در کوره الکتریکی به مدت ۲ ساعت کلسینه شد (۹). $\text{g-C}_3\text{N}_4$ با ترکیب ۱۰ گرم اوره و آب دیونیزه در بوتله چینی و کلسینه کردن آن در کوره الکتریکی با دمای ۵۰۰ درجه سلسیوس به مدت ۸ ساعت حاصل شد (۱۰).

مشخصه‌یابی کاتالیست‌ها

مورفولوژی و ساختار کاتالیست‌ها با میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی (FE-SEM TESCAN MIRA3) آنالیز شد. X-ray افتراقی (XRD XPert PRO) برای تعیین فازهای

¹ Volatile organic compounds

² Photocatalytic Oxidation

³ Band gap

⁴ Valence bands

⁵ Conduction bands

تولید شد. رطوبت نسبی و دمای جریان هوا به صورت پیوسته به وسیله یک رطوبت‌سنج (Sunward Eng SUN25H) و یک دماسنج (Sunward Eng SUN35-TC) پایش شد. در ادامه، هوای دارای رطوبت نسبی معین، از داخل ویال‌های حاوی تولوئن عبور کرده و به اتاقک اختلاط وارد گردید. نهایتاً جریان هوا با دبی، رطوبت نسبی و غلظت مشخص از بخار تولوئن وارد لوله‌ای شفاف و از جنس کوارتز که داخل آنها با نانوکاتالیست پوشش شده بود؛ گردید. لوله‌های کوارتز به طول ۱۵۰ میلی‌متر، قطر داخلی ۱۲/۵ میلی‌متر، با ضخامت دیواره ۲/۵ میلی‌متر به صورت دستی و جداگانه برای هر نانوکاتالیست پوشش داده شد. طول مؤثر نانوکاتالیست‌های پوشش داده شده برای تمام لوله‌ها، ۱۰۰ میلی‌متر و مقدار کاتالیست پوشش داده شده در هر لوله ۰/۲ گرم در نظر گرفته شد. در هر آزمایش، یکی از لوله‌ها در مدار سیستم تست قرار داده شده و بر اساس ویژگی‌های جذب نور کاتالیست‌های تحت مطالعه، چهار لامپ LED با طیف حدود ۴۲۰ تا ۷۸۰ نانومتر (پیک غالب ۴۵۱ نانومتر) با توان ۵۰ وات در فاصله ۱۰ سانتی‌متری از هر سمت لوله شیشه‌ای قرار گرفتند. برای محاسبه راندمان، ابتدا به منظور حذف اثر جذب سطحی بر روی نانوکاتالیست‌ها و دیواره لوله کوارتز، غلظت خروجی تا رسیدن به غلظت ورودی به سیستم پایش شد تا غلظت در قبل و بعد از کاتالیست یکسان باشد، هنگام رسیدن به این مرحله لامپ‌ها روشن شده و مقدار غلظت خروجی به طور مداوم اندازه‌گیری می‌شد. درصد کاهش تولوئن با استفاده از معادله زیر تعیین گردید:

$$\eta = \frac{C_0 - C}{C_0} \times 100 \quad (1)$$

در اینجا C_0 و C ، به ترتیب غلظت تولوئن قبل و بعد از راکتور بر حسب ppm است.

جهت سنجش غلظت تولوئن در ورودی و خروجی راکتور، نمونه هوا توسط سرنگ عایق گاز هامیلتون^۳ جمع‌آوری و سریعاً و به طور مستقیم به دستگاه کروماتوگرافی (GC)^۴

کاتالیست‌ها به کار رفت. عناصر شیمیایی کاتالیست‌های سنتز شده با تکنیک طیف‌سنجی پراش انرژی پرتو ایکس (EDX) مشخصه‌یابی شد. مساحت سطح ویژه کاتالیست‌ها با استفاده از جذب و واجذب نیتروژن و گروه‌های عاملی نمونه‌ها توسط طیف مادون قرمز تبدیل فوریه (FT-IR- Perkin Elmer with KBr) تعیین شد.

تعداد نمونه و طراحی آزمایش

بهینه‌سازی شرایط عملیاتی کاتالیزورها با استفاده از روش طراحی مرکب مرکزی (CCD) مبتنی بر روش سطح پاسخ (RSM) با فرض ۵ نقطه مرکزی برای تعیین حجم نمونه و با استفاده از نرم‌افزار Design expert انجام شد. طراحی آزمایشی و CCD برای تجزیه و تحلیل و مدل‌سازی فرایندهایی استفاده می‌شوند که در آن یک پاسخ تحت تأثیر پارامترهای متعدد قرار می‌گیرد. مطابق مطالعات پیشین، با ثابت نگه‌داشتن پارامترهایی همچون شدت نور، وزن نانوکاتالیست و دمای هوا برای تمام کاتالیست‌ها، در این مطالعه، دبی هوا (در سه سطح ۱۵، ۳۰ و ۴۵ ml/min)، غلظت تولوئن (C) (مقادیر ۱۰، ۲۰، ۳۰) و رطوبت نسبی (B) (مقدار ۳۰، ۵۰، ۷۰٪) به عنوان متغیر مستقل تعریف شدند. با استفاده از نرم‌افزار، مجموعاً ۲۰ آزمایش برای هر نانوکاتالیست تعیین شد.

پایلوت آزمایشگاهی جهت بررسی حذف فتوکاتالیستی تولوئن هوا

هوای پاک با جریان مداوم توسط یک کپسول هوای مجهز به رگلاتور تأمین شد و دبی آن توسط دو عدد فلومتر گاز در ابتدا و انتهای پایلوت پایش گردید. رطوبت نسبی^۱ هوای گاز با عبور از مسیر سیستم تأمین رطوبت و به روش بخار اشباع تأمین شد. به این منظور، یک ظرف حاوی ۲۵ میلی‌لیتر آب مقطر در یک حمام آب در دمای ثابت قرار گرفت. یک ترموستات Samwon Eng, SU-1051P مجهز به یک دیمر^۲، دمای حمام آب را تنظیم نمود. در این شرایط، بخار آب با نرخ یکنواخت

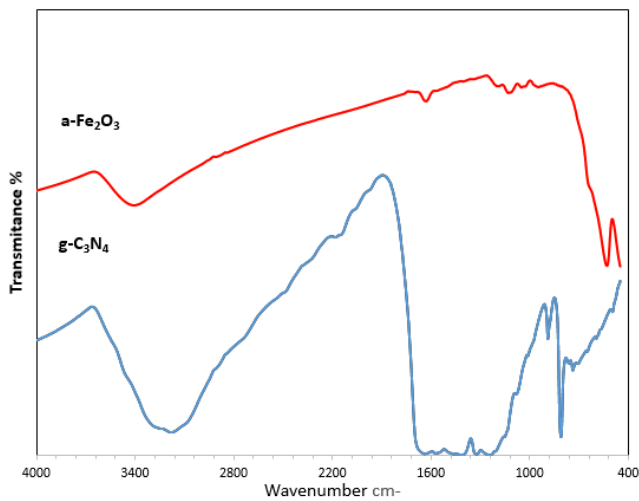
^۱ Relative humidity (RH)

^۲ Dimmer

^۳ Hamilton syringes gas tight

^۴ Gas Chromatography

شده در حدود 3400 cm^{-1} مربوط به ارتعاشات کششی O-H به جذب آب نسبت داده می‌شود. در نوار $\text{g-C}_3\text{N}_4$ پیک‌های مشخص مشاهده شده در محدوده 1640 cm^{-1} - 1200 cm^{-1} نتیجه ارتعاش کششی پیوندهای C-N در حلقه آروماتیک است. علاوه بر این، طیف‌های گسترده شناسایی شده در ناحیه 3300 cm^{-1} - 3100 cm^{-1} به ارتعاش کششی پیوندهای N-H و پیک قوی در 812 cm^{-1} به واحدهای تریازین نسبت داده می‌شود (۱۳).
طیف مادون قرمز-تبدیل فوریه نانوکاتالیست‌های سنتز شده در شکل ۲ ارائه شده است.



شکل ۲. طیف FT-IR $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ و $\text{g-C}_3\text{N}_4$

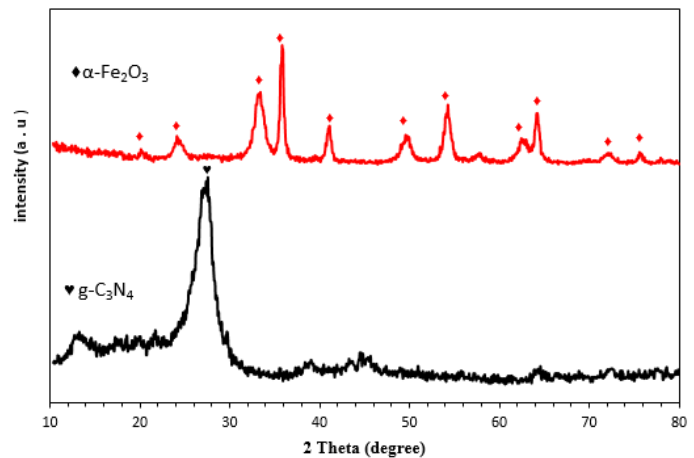
مورفولوژی نانوکاتالیست‌ها با استفاده از دستگاه‌های FE-SEM مشخصه‌یابی شد که نتایج آن در شکل ۳ ارائه و نتایج آنالیز EDX در شکل ۴ ارائه شده است. همچنین مساحت سطح ویژه‌ی $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ حدود 120 g/m^2 و $\text{g-C}_3\text{N}_4$ 78 g/m^2 بدست آمد.

مجهز به آشکارساز شعله‌ای - یونی^۱ و با طول ستون موئین ۳۰ متری HP_فیل متیل سیلو کسان ۸٪ تزریق شد.

یافته‌ها

مشخصه‌یابی نانوکاتالیست‌ها

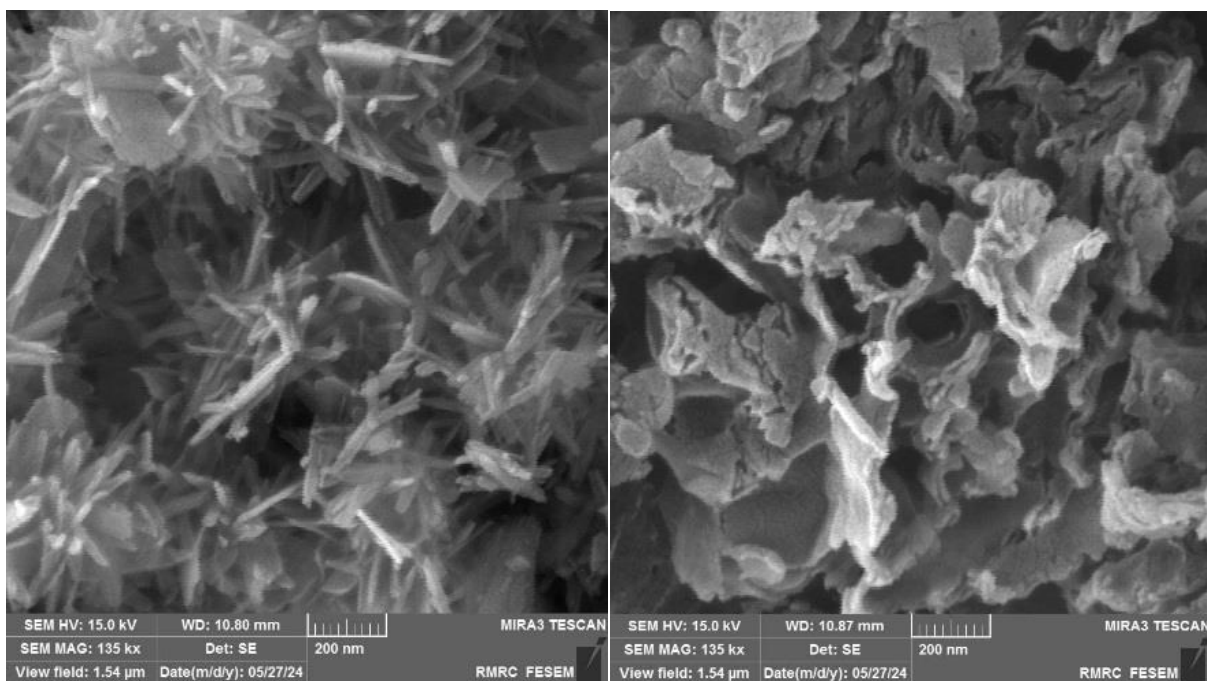
شکل ۱ الگوی پراش اشعه x فتوکاتالیست‌های سنتز شده را نشان می‌دهد. در XRD نمونه $\text{g-C}_3\text{N}_4$ خالص شکل ۱، دو طیف پراش متمایز در زوایای 2θ برابر $13/1$ و $27/5$ درجه مشاهده شد که مرتبط با صفحات کریستالی (۱۰۰) و (۰۰۲) می‌باشد (JCPDS No. 87-1526) (۱۱). طیف‌های نمونه‌ی $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ در زوایای 2θ برابر $24/2$ ، $32/2$ ، $35/7$ ، $40/9$ ، $49/5$ ، $54/2$ ، $57/6$ ، $62/5$ ، $64/1$ ، 72 ، $75/5$ ظاهر شدند که به ترتیب قابل تعمیم به صفحات (۰۱۲)، (۱۰۴)، (۱۱۰)، (۱۱۳)، (۰۲۴)، (۱۱۶)، (۰۱۱۸)، (۲۱۴)، (۳۰۰)، (۱۰۱۰) و (۲۲۰) می‌باشند (JCPDS No. 33-0664) (۱۲).



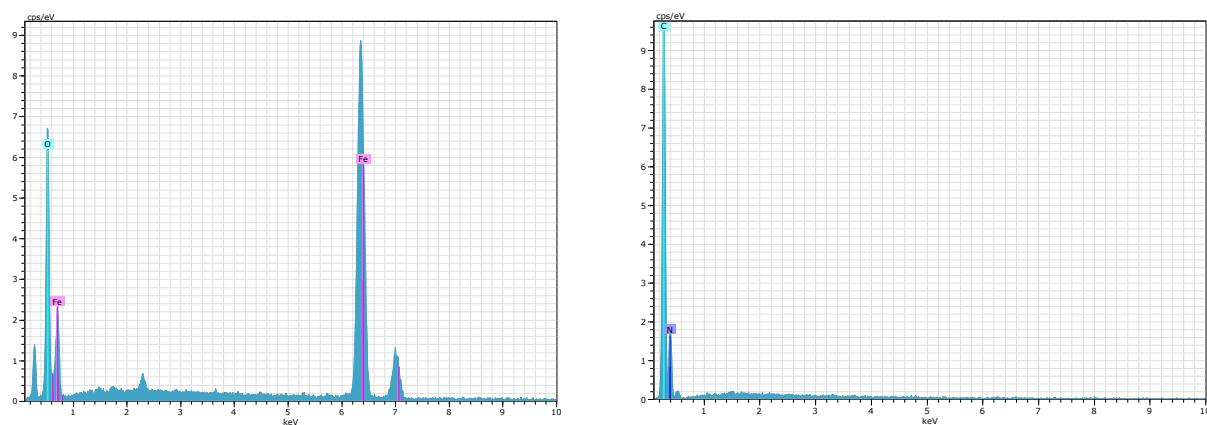
شکل ۱. طیف XRD $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ و $\text{g-C}_3\text{N}_4$

همچنین، طیف FT-IR نانوکامپوزیت‌ها (شکل ۲) حضور پیک‌های مرتبط با $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ و $\text{g-C}_3\text{N}_4$ را نشان می‌دهند. در نانوکاتالیست $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ پیک‌های 540 cm^{-1} و 452 cm^{-1} قابل‌استناد به حالت‌های ارتعاش کششی و خمشی Fe-O می‌باشند. در نمونه خالص $\text{g-C}_3\text{N}_4$ نوار پهن و ضعیف مشاهده

^۱ Flame ionization detector (FID)



شکل ۳. تصاویر FESEM α -Fe₂O₃ (چپ) و g-C₃N₄ (راست)



شکل ۴. نتایج EDX α -Fe₂O₃ (چپ) و g-C₃N₄ (راست)

بررسی راندمان فتوکاتالیستی و تأثیر متغیرها

از آزمایش‌ها، نرم‌افزار Design expert معادله درجه دوم چندجمله‌ای را پیشنهاد داد:

برای نانوکاتالیست α -Fe₂O₃، بر اساس نتایج واقعی حاصل

$$Y = +17.11 - 3.78A - 63.4 - 1.59C + 0.40AB - 0.28AC - 0.50BC - 1.19A^2 + 0.16B^2 + 0.26C^2$$

جدول ۱. نتایج ANOVA برای بررسی اثر متغیرها بر بازده حذف تولوئن توسط فتوکاتالیست $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ و اثر متقابل متغیرها بر هم

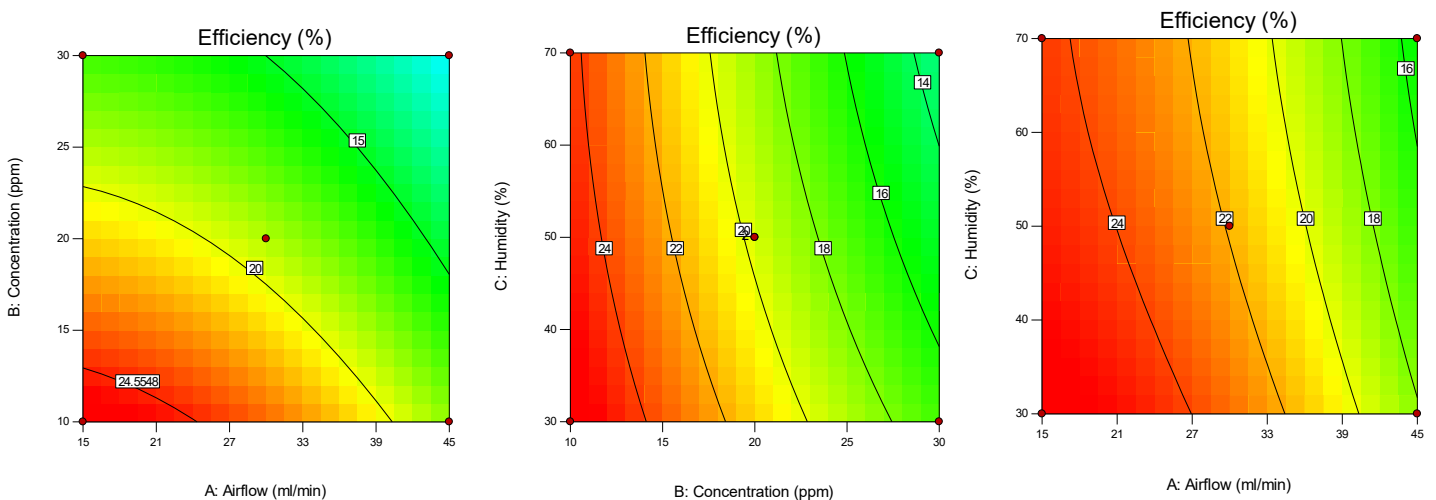
Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F-Value	p-value	
Model	399/53	9	44/39	171/91	< 0/0001	significant
A-Flow	153/12	1	153/12	592/95	< 0/0001	
B-Concentration	214/37	1	214/37	830/13	< 0/0001	
C-Humidity	25/28	1	25/28	97/90	< 0/0001	
AB	1/28	1	1/28	4/96	0/0501	
AC	0/61	1	0/61	2/34	0/1569	
BC	2/00	1	2/00	7/74	0/0194	
A ²	4/69	1	4/69	18/17	0/0017	
B ²	0/078	1	0/078	0/30	0/5954	
C ²	0/20	1	0/20	0/78	0/3972	
Residual	2/58	10	0/26			
Lack of Fit	1/84	5	0/37	2/49	0/1697	not significant
Pure Error	0/74	5	0/15			
Cor Total	402/11	19				

$R^2 = 0.9936$ Adjusted $R^2 = 0.9878$, Predicted $R^2 = 0.9501$, Adequate Precision = 55.66

برای نانوکاتالیست $\text{g-C}_3\text{N}_4$ ، براساس نتایج واقعی حاصل از آزمایشات، نرم‌افزار Design expert معادله درجه دوم چند جمله‌ای را پیشنهاد داد:

$$Y (\%) = + 11.74 - 3.96 A - 4.55 B - 1.28 C + 0.76 AB + 0.088AC - 0.19BC - 1.07A^2 + 0.4 \cdot B^2 - 0.45C^2$$

براین اساس جدول ۱، مدل پیشنهادی توسط نرم‌افزار، معنی‌دار است. مقدار R^2 معادل ۰/۹۹۳۶ و نزدیک به ۱ بوده و مقادیر R^2 تصحیح شده ۰/۹۸۹۷ و R^2 پیش‌بینی شده ۰/۹۵۰۱ بدست آمد.



شکل ۵. اثرات همزمان متغیرها بر بازده حذف تولوئن در سیستم فتوکاتالیست $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$

آزمایش‌ها نرم‌افزار Design expert معادله درجه دوم چند جمله‌ای را پیشنهاد داد:

برای نانوکاتالیست $\text{g-C}_3\text{N}_4$ ، بر اساس نتایج واقعی حاصل از

$$Y (\%) = + 11.74 - 3.96 A - 4.55 B - 1.28 C + 0.76 AB + 0.088AC - 0.19BC - 1.07A^2 + 0.4 \cdot B^2 - 0.45C^2$$

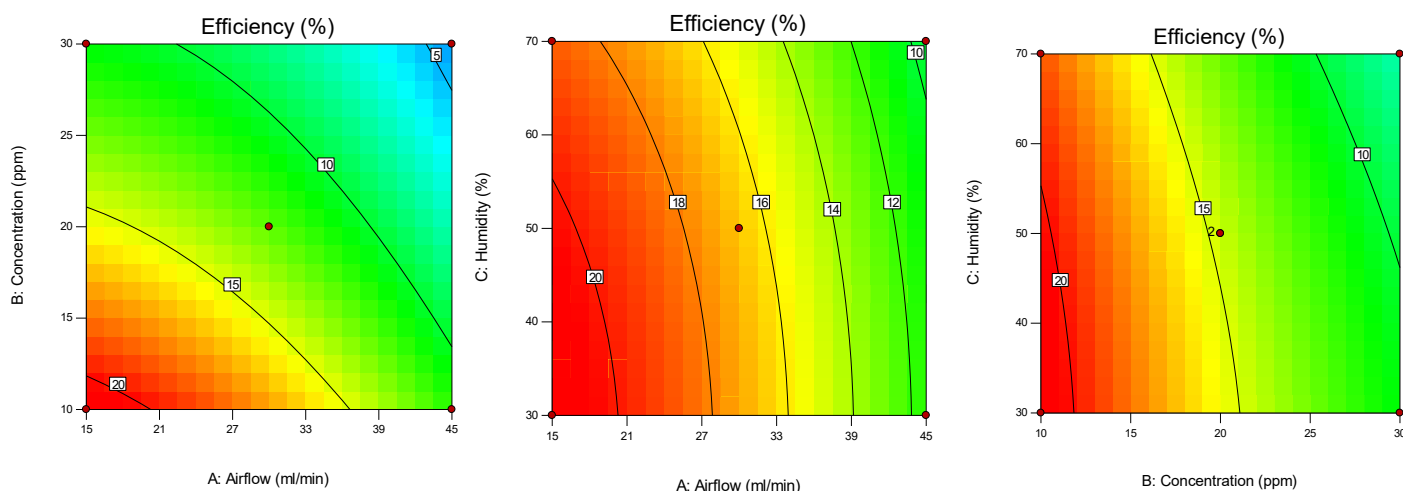
جدول ۲. نتایج ANOVA برای بررسی اثر متغیرها بر بازده حذف تولوئن توسط فتوکاتالیست g-C₃N₄ و اثر متقابل متغیرها بر هم

Source	Sum of Squares	df	Mean Square	F-Value	p-value	
Model	402/87	9	44/76	78/59	< 0/0001	significant
A-Flow	167/75	1	167/75	294/52	< 0/0001	
B-Concentration	207/02	1	207/02	363/47	< 0/0001	
C-Humidity	16/38	1	16/38	28/77	0/0003	
AB	4/65	1	4/65	8/17	0/0170	
AC	0/061	1	0/061	0/11	0/7497	
BC	0/28	1	0/28	0/49	0/4983	
A ²	3/80	1	3/80	6/67	0/0273	
B ²	0/47	1	0/47	0/82	0/3872	
C ²	0/59	1	0/59	1/04	0/3322	
Residual	5/70	10	0/57			
Lack of Fit	3/30	5	0/66	1/38	0/3661	not significant
Pure Error	2/39	5	0/48			
Cor Total	408/56	19				

$R^2 = 0.9861$, Adjusted $R^2 = 0.9735$, Predicted $R^2 = 0.9267$, Adequate Precision = 36.678

مقدار R^2 معادل ۰/۹۸۶۱ و مقادیر R^2 تصحیح شده ۰/۹۷۳۵ و R^2 پیش بینی شده ۰/۹۲۶۷ بدست آمد.

بر این اساس (جدول ۲)، مدل پیشنهادی توسط نرم افزار، معنی دار است.



شکل ۶. اثرات همزمان متغیرها بر بازده حذف تولوئن در سیستم فتوکاتالیست g-C₃N₄

و ۶) هر سه متغیر دبی هوا، غلظت آلاینده و رطوبت نسبی بر میزان راندمان اثرگذار بودند. در هر دو کاتالیست، غلظت تولوئن و رطوبت نسبی به ترتیب بیشترین و کمترین تأثیر را بر راندمان فتوکاتالیستی داشتند. به طوری که با کاهش

نمودارهای گرافیکی مقدار راندمان حداکثر و اثرات همزمان متغیرها بر روی راندمان فتوکاتالیستی حذف تولوئن را نشان می دهد. بر اساس تصاویر، حداکثر راندمان حذف تولوئن توسط کاتالیست Fe₂O₃ برابر با ۲۵/۵ درصد و برای g-C₃N₄ ۱۹ درصد به دست آمد. مطابق با خروجی گرافیکی (شکل ۵

غلظت، دبی و رطوبت نسبی راندمان تخریب تولوئن افزایش می‌یافت.

بحث

در این پژوهش، کاتالیست‌های $\text{g-C}_3\text{N}_4$ و $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ به صورت جداگانه سنتز و راندمان حذف تولوئن از جریان هوا توسط آن‌ها به صورت مجزا بررسی و مقایسه شد.

در گزارش XRD مربوط به $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ هیچ پیکی برای ناخالصی‌هایی مانند $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ و Fe_3O_4 مشاهده نشد که نشان می‌دهد پیش‌ساز R-FeOOH در دمای ۳۰۰ درجه سلسیوس به طور کامل به $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ تبدیل شده است. همچنین در طیف $\text{g-C}_3\text{N}_4$ پیک اضافی دید نشد که نشان دهنده خلوص بالای این ماده بعد از سنتز است. یافته‌های FT-IR در کنار نتایج XRD نشان داد که ساختار شیمیایی نمونه‌ها در طول فرآیند سنتز بدون تغییر باقی مانده است. به منظور تایید تشکیل فتوکاتالیست‌ها، از آنالیزهای نقشه‌برداری عنصری و EDX استفاده شد. نمودارهای EDX ارائه شده در شکل ۴ مؤید این است که درصد وزنی عناصر فتوکاتالیست‌ها تقریباً مطابق با درصد وزنی تئوری آنها می‌باشد. در FESEM نانو کاتالیست $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (شکل ۳)، تصاویر به وضوح نشان می‌دهد که نمونه دارای مورفولوژی صاف و میله‌ای می‌باشد. درباره‌ی $\text{g-C}_3\text{N}_4$ ساختار صفحه‌ای (silk-like) دیده می‌شود. به‌طور کلی، نتایج آنالیزهای فوق، توافق خوبی با یکدیگر داشته و بیانگر سنتز موفق کاتالیست‌های مورد مطالعه هستند.

کارایی فتوکاتالیست‌های سنتز شده با میزان حذف تولوئن از جریان هوا مورد قضاوت قرار گرفت. خروجی مدل هر دو کاتالیست، پاسخ‌های صحیح را پیش‌بینی کردند. راندمان $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ بالاتر از $\text{g-C}_3\text{N}_4$ بدست آمد. دلیل این موضوع را احتمالاً بتوان به مساحت سطح ویژه‌ی بالاتر ساختارهای لوله‌ای $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ نسبت داد. مطابق با نتایج، دبی هوا، غلظت آلاینده و رطوبت نسبی بر میزان راندمان اثرگذار بودند. کاتالیزورها بسته به ویژگی‌های ظاهری و نوری خود، توان و ظرفیت مشخصی برای تجزیه آلاینده دارند. با ورود مقادیر آلاینده بیش از ظرفیت به راکتور فتوکاتالیستی، شانس و فرصت برهم‌کنش تمام مولکول‌های آلاینده با گونه‌های فعال کاهش می‌یابد (۱۴، ۱۵). بنابراین، با افزایش چندین برابری

غلظت، کاهش محسوسی در راندمان مشاهده می‌شود. علاوه بر این با افزایش دبی، راندمان حذف تولوئن کاهش می‌یابد، که می‌توان آن را به کاهش زمان ماندگاری جریان هوا در راکتور و فرصت ناکافی برای مولکول‌های تولوئن جهت برهم‌کنش با فتوکاتالیست نسبت داد (۱۶، ۱۷). بنابراین، یکی از موارد اصلاحی جهت بهبود راندمان می‌تواند تغییر در ابعاد طولی بسترهای پوشش داده شده با کاتالیست جهت افزایش زمان ماند آلاینده در راکتور فتوکاتالیستی باشد. از طرفی، حداقل رطوبت نسبی برای تولید رادیکال‌های فعال جهت حذف فتوکاتالیستی ترکیبات آلی فرار در هوا ضروری است (۱۸) با این وجود، با افزودن رطوبت نسبی بیش از حد به سیستم کاتالیزوری، به دلیل غلبه مولکول‌های آب بر مولکول‌های تولوئن در فرآیند جذب بر روی سطح کاتالیزور راندمان کاهش می‌یابد.

پروری و همکاران راندمان حذف اتیل بنزن توسط فتوکاتالیست‌های $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ و $\text{g-C}_3\text{N}_4$ را به ترتیب حدود ۲۰ و ۱۹ درصد گزارش کردند (۱۴، ۱۹). به نظر می‌رسد دلیل راندمان بالاتر $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ به ساختار لوله‌ای آن در مطالعه حاضر (در مقایسه با ساختار کروی) و به دلیل مساحت سطح ویژه‌ی بالاتر این نوع از ترکیبات نسبت داد. در مطالعه محمدی و همکاران، مقدار راندمان حذف تولوئن با SfTiO_3 تحت نور مرئی حدود ۲۷ درصد بدست آمد. تفاوت در نوع کاتالیست و اختلاف در شرایط آزمایش همچون نور لامپ و طول پوشش کاتالیست استفاده شده، می‌تواند دلیل راندمان بالاتر در مطالعه ایشان باشد (۲۰). در مطالعه‌ی ژنگ و همکاران، راندمان حذف تولوئن از جریان هوا توسط کاتالیست TiNbON در نور مرئی برای غلظت معادل ۵ppm از آلاینده، حدود ۵۸ درصد حاصل شده است. تفاوت شرایط آزمون، به‌خصوص غلظت آلاینده راندمان بالاتر حاصل در این مطالعه نسبت به پژوهش حاضر است (۲۱).

مکانیسم احتمالی حذف فتوکاتالیستی به این صورت است که با تابش نور مرئی به $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ و $\text{g-C}_3\text{N}_4$ ، فوتون‌های نور در آن‌ها جذب و الکترون‌ها از لایه ظرفیت به لایه رسانش منتقل می‌شوند. در اثر این انتقال، جفت الکترون حفره‌ها در سطح کاتالیست‌ها ایجاد می‌گردد. در $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ حفرات ایجاد شده در لایه ظرفیت با H_2O یا یون‌های هیدروکسید (OH^-) ترکیب

تشکر و قدردانی

از معاونت پژوهش و فناوری دانشگاه علوم پزشکی همدان به دلیل حمایت‌های مالی کمال تشکر را داریم.

ملاحظات اخلاقی

ملاحظات اخلاقی خاصی وجود ندارد.

کد اخلاق

IR.UMSHA.REC.1401.691

تضاد منافع

هیچ‌گونه تضاد منافی بین نویسندگان وجود ندارد.

حمایت مالی

مقاله حاضر بخشی از پایان‌نامه مقطع دکتری و با حمایت مالی معاونت پژوهش و فناوری دانشگاه علوم پزشکی همدان با شماره ۱/۴۰۱/۱۲۰/۹۱۰/۶۷۵ انجام گرفته است.

سهم نویسندگان

طراحی مطالعه: فرشید قربانی شهنا و سعید عزیزیان.
انجام آزمایشات: رضوان عابدینلو.
اعتبارسنجی نتایج آزمایشگاهی: عبدالرحمن بهرامی و مجید حبیبی محرز.
نگارش مقاله: رضوان عابدینلو، فرشید قربانی شهنا ویرایش نهایی مقاله: کلیه نویسندگان
همه نویسندگان در تدوین مقاله مشارکت نموده و نسخه نهایی را مطالعه و تأیید کردند.

References:

- Robert B, Nallathambi G. A concise review on electrospun nanofibres/nanonets for filtration of gaseous and solid constituents (PM2. 5) from polluted air. *Colloid and Interface Science Communications*. 2020;37:100275.
- Cheng C, Jing H, Ji H, Li Y, Ma L, Hao J. Bioderived carbon aerogels loaded with g-C₃N₄ and their high Efficacy removing volatile

شده و تولید رادیکال‌های هیدروکسیل کننده (OH*) می‌کنند. در g-C₃N₄ نیز الکترون‌های لایه رسانس با مولکول O₂ ترکیب و رادیکال‌های سوپراکساید (O₂*) ایجاد می‌کنند. رادیکال‌های OH* و O₂* در برهم‌کنش با مولکول‌های تولوئن، آنها را به آب و CO₂ تبدیل می‌کنند. به‌طور کلی، اگرچه راندمان تخریب تولوئن توسط کاتالیست‌های مورد مطالعه مقادیر بالا نیست؛ اما باید در نظر داشت با توجه به مقدار کم کاتالیست پوشش داده و استفاده شده، راندمان تخریب مقدار قابل قبولی است؛ لذا چنانچه مقدار کاتالیست افزایش یابد، انتظار می‌رود راندمان تخریب نیز بهبود افزایش یابد.

نتیجه‌گیری

کاتالیست α -Fe₂O₃ راندمان نسبتاً بهتری نسبت به g-C₃N₄ داشت؛ اما با توجه به اینکه هر دو کاتالیست قابلیت فعال شدن با نور مرئی را دارند، با اعمال اصلاحات بر روی آن‌ها و تشکیل کمپوزیت‌های چندجزئی در مطالعات آتی می‌توان خواص فتوکاتالیستی آن‌ها را بهبود بخشید. همچنین، با توجه به اینکه هر دو کاتالیست دارای مزایای قابل توجهی همچون عدم سمیت، سنتز آسان، دسترسی و قیمت پایین هستند، می‌توان از آن‌ها در محیط‌های واقعی برای غلظت‌های کم آلاینده‌های فرار استفاده کرد. از محدودیت‌های مطالعه، می‌توان به عدم دسترسی آسان به دستگاه‌های پیشرفته‌تر همانند XPS، HRTEM، و دستگاه پایش سریع (first check) به دلیل هزینه‌های بالا نام برد.

organic compounds (VOCs). *Journal of Colloid and Interface Science*. 2025;678:1112-21.

- Tian T, Zhang J, Ge S, Tian L. Enhanced gaseous benzene degradation by bimetallic MIL-101 (Fe, Cu) activated persulfate system: Efficiency and mechanism. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. 2025;706:135785.
- Xu J, Zhu S, Zhou H, Hou M, Wan K, Zhang X, et al. Rational Design of Z-Scheme Heterostructures Composed of Bi/Fe-Based MOFs for the Efficient Photocatalytic

Degradation of Organic Pollutants. *Catalysts*. 2024;14(6):356.

5. Mamba G, Mishra A. Graphitic carbon nitride (g-C₃N₄) nanocomposites: a new and exciting generation of visible light driven photocatalysts for environmental pollution remediation. *Applied Catalysis B: Environmental*. 2016;198:347-77.

6. Khurram R, Nisa ZU, Javed A, Wang Z, Hussien MA. Synthesis and characterization of an α -Fe₂O₃-decorated g-C₃N₄ heterostructure for the photocatalytic removal of MO. *Molecules*. 2022;27(4):1442.

7. Cong X, Li A, Guo F, Qin H, Zhang X, Wang W, et al. Construction of CdS@ g-C₃N₄ heterojunction photocatalyst for highly efficient degradation of gaseous toluene. *Science of The Total Environment*. 2024;913:169777.

8. Zhou X, Wang T, He D, Chen P, Liu H, Lv H, et al. Efficient photocatalytic desulfurization in air through improved photogenerated carriers separation in MOF mil101/carbon dots-g-C₃N₄ nanocomposites. *Angewandte Chemie*. 2024;136(35):e202408989.

9. Abedinpour Farahmand R, Raouf F, Hamedi S, Gilani N. Investigation on antibacterial activity of α -Fe₂O₃/ZnO nanocomposites against Gram-positive and Gram-negative bacteria. *Materials Technology*. 2022;37(12):2265-75.

10. Yang H, He D, Liu C, Zhang T, Qu J, Jin D, et al. Visible-light-driven photocatalytic disinfection by S-scheme α -Fe₂O₃/g-C₃N₄ heterojunction: Bactericidal performance and mechanism insight. *Chemosphere*. 2022;287:132072.

11. Zhang C, Zhou Y, Bao J, Fang J, Zhao S, Zhang Y, et al. Structure regulation of ZnS@ g-C₃N₄/TiO₂ nanospheres for efficient photocatalytic H₂ production under visible-light irradiation. *Chemical Engineering Journal*. 2018;346:226-37.

12. Wang Y, Cao J, Wang S, Guo X, Zhang J, Xia H, et al. Facile synthesis of porous α -Fe₂O₃ nanorods and their application in ethanol sensors. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2008;112(46):17804-8.

13. Zou H, Yan X, Ren J, Wu X, Dai Y, Sha D, et al. Photocatalytic activity enhancement of modified g-C₃N₄ by ionothermal

copolymerization. *Journal of Materiomics*. 2015;1(4):340-7.

14. Parvari R, Ghorbani-Shahna F, Bahrami A, Azizian S, Assari MJ, Farhadian M. α -Fe₂O₃/Ag/g-C₃N₄ Core-Discontinuous shell nanocomposite as an indirect Z-Scheme photocatalyst for degradation of ethylbenzene in the air under white leds irradiation. *Catalysis Letters*. 2020;150(12):3455-69.

15. Zhu X, Tu X, Mei D, Zheng C, Zhou J, Gao X, et al. Investigation of hybrid plasma-catalytic removal of acetone over CuO/ γ -Al₂O₃ catalysts using response surface method. *Chemosphere*. 2016;155:9-17.

16. Yazdani-Aval M, Alizadeh S, Bahrami A, Nematollahi D, Ghorbani-Shahna F. Efficient removal of gaseous toluene by the photoreduction of Cu/Zn-BTC metal-organic framework under visible-light. *Optik*. 2021;247:167841.

17. Chun H-H, Jo W-K. Visible-light-responsive carbon-embedded photocatalyst coupled with plug-flow reactor for decomposition of vaporous aromatics. *Chinese Journal of Catalysis*. 2013;34(6):1256-61.

18. Dursun S, Ayturan ZC. Simultaneous removal of gaseous benzene and toluene with photocatalytic oxidation process at high temperatures under UVC irradiation. *Environ Sci Pollut Res Int*. 2022;29(25):38232-47.

19. Parvari R, Ghorbani-Shahna F, Bahrami A, Azizian S, Assari MJ, Farhadian M. A novel core-shell structured α -Fe₂O₃/Cu/g-C₃N₄ nanocomposite for continuous photocatalytic removal of air ethylbenzene under visible light irradiation. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*. 2020;399:112643.

20. Mohammadi P, Ghorbani Shahna F, Bahrami A, Rafati AA, Farhadian M. Enhanced photocatalytic activity of hydrothermally synthesised SrTiO₃/rGO for gaseous toluene degradation in the air: modelling and process optimisation using response surface methodology. *International Journal of Environmental Analytical Chemistry*. 2022;102(1):222-42.

21. Zhong L, Branch JJ, Batterman S, Bartlett BM, Godwin C. Experimental and modeling study of visible light responsive photocatalytic oxidation (PCO) materials for toluene degradation. *Appl Catal B*. 2017;216:122-32.

Comparison of Air Aromatic Pollutant Removal Performance Using $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ and $\text{g-C}_3\text{N}_4$ Catalysts Through Response Surface-Based Central Composite Design Methodology

Farshid Ghorbani Shahna¹, Rezvan Abedinloo^{1*}, Abdulrahman Bahrami¹, Saeid Azizian², Majid Habibi Mohraz¹

1. Department of Occupational Health and Safety Engineering, School of Public Health, Hamedan University of Medical Sciences, Hamedan, Iran.

2. Department of Chemistry-Physic, Faculty of Petroleum Sciences and Chemistry, Bu Ali University, Hamedan, Iran.

Received: 01/11/2025

ePublished: 20/12/2025

ABSTRACT:

Introduction: Volatile organic compounds are some of the most significant and diverse gaseous air pollutants, which can lead to numerous health and environmental issues. Therefore, controlling their emissions from indoor air is essential and crucial. Recently, photocatalytic oxidation technology has gained considerable attention due to its ability to convert pollutants into less hazardous compounds in the presence of light. The objective of this study is to compare the performance of toluene degradation in air using $\text{g-C}_3\text{N}_4$ and $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ photocatalysts under visible light.

Methods: The $\text{g-C}_3\text{N}_4$ and $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ photocatalysts were synthesized, and the photocatalytic efficiency of toluene removal using these catalysts under visible light was investigated. The catalysts were characterized using FTIR, XRD, FE-SEM, and EDX techniques. The effects of input toluene concentration, air flow rate, and relative humidity, as well as their interactions, on toluene removal efficiency were examined using central composite design methodology.

Results: The toluene removal efficiency achieved was approximately 25.5% for $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ and 19% for $\text{g-C}_3\text{N}_4$. The superior efficiency of $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ can be attributed to its higher bandgap and tubular structure. Among the factors studied, the initial concentration of toluene had the most significant effect on photocatalytic removal efficiency, while relative humidity exhibited the least impact.

Conclusion: The $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ catalyst demonstrated a relatively better performance compared to $\text{g-C}_3\text{N}_4$. Given that both catalysts possess notable advantages such as non-toxicity, easy synthesis, availability, and low cost, they can be effectively utilized in real environments for the removal of low concentrations of volatile organic pollutants.

Keyword: Air pollutants, photocatalyst, reactor, visible light, Response Surface Methodology

*Corresponding Author: Rezvan Abedinloo, e-mail: R.abedinloo@gmail.com

CITATION: Ghorbani Shahna F., Abedinloo R., Bahrami A., Azizian S., Habibi Mohraz M. Comparison of Air Aromatic Pollutant Removal Performance Using $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ and $\text{g-C}_3\text{N}_4$ Catalysts Through Response Surface-Based Central Composite Design Methodology. Journal of Saveh University of Medical Sciences, 2025; 1(3): 82-92. doi: 10.22034/sumsj.2026.569671.1071